

○小林舞子, 宮永拓弥(日産化学株式会社)

### 【緒言】

高い活性保持と製造工程が簡便である乳剤は、目や皮膚に強い刺激性を持つことが知られている。近年、低刺激製剤への要求の高まりから、グリーン溶剤への転換の動きが活発化している。さらに、農薬原体の構造の複雑化も相まって、原体の溶剤への溶解度は低下する傾向にある。そのため、環境にやさしい乳剤の設計は、膨大な検討数と時間を要する。

データを簡単に蓄積することが可能となったいわゆるビッグデータ社会において、膨大なデータから有益な情報を抽出し、未知データの予測や要因解明を行うことが可能な機械学習法によるデータ解析に注目が集まっている。本手法を用いた特性予測は高い予測能と即時予測が可能となっていることから、効率的に要求特性を満たす条件探索の解析手法として様々な産業分野で既に適用されている。

本発表では効率的かつ戦略的な製剤設計を目的として、機械学習法を用いた溶解性予測モデルの作成を試みた。

### 【溶解性予測モデルの作成】

今回、単一溶媒・混合溶媒に対する溶解性予測モデルをそれぞれ作成した。各モデルは、原体および溶媒の構造情報から溶解性を予測するモデルである。モデルは、機械学習法の一つであるサポートベクター回帰(SVR)を用いた。モデル作成に用いなかったデータ(検証データ)の予測精度を確認することでモデルの汎用性を評価した。

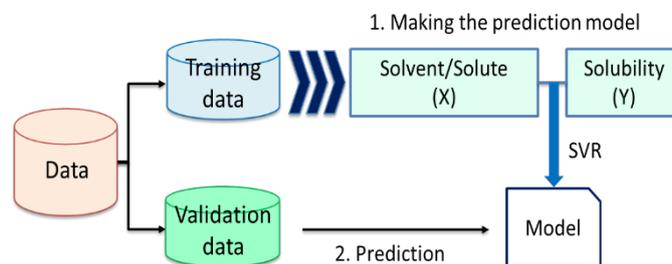


Fig1.Flowchart of making the model

## Solubility Prediction by Machine Learning

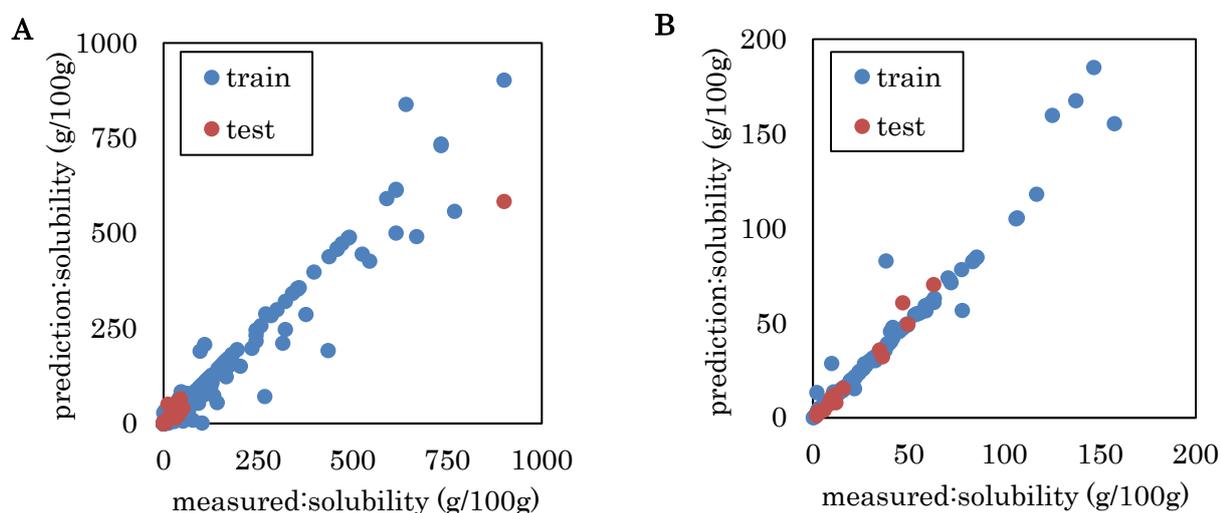
○Maiko Kobayashi and Takuya Miyanaga

(Nissan Chemical Co., Ltd.)

In emulsifiable concentrate design, shifting to green solvents is strongly desired as the alternative to solvents which are the irritating compounds. However we need to conduct a huge amount of experiments to determine the optimal solvent. So, we attempted to make the solubility prediction models by machine learning which is known for the high predictive performances and the immediate evaluation. As a result, we succeeded in constructing models with high predictive performance that may open the door to efficient solvent design.

## 【結果】

単一溶媒に対する溶解性評価モデルにおける検証データの予測精度は、 $R^2=0.98$  であり、高い予測能が確認された (Fig.2A)。混合溶媒に対する溶解性評価モデルにおける非学習データの予測精度は、 $R^2=0.98$  であり、高い予測能が確認された (Fig.2B)。また、混合溶媒に対する溶解性は、ある特定の溶媒を組み合わせることによって溶解性が向上する相乗効果と呼ばれる特徴を有する。本モデルは、高い予測能だけでなく、相乗効果の評価も可能であることが確認された (Tab.1)。



**Figure2:** Result of solubility prediction model using (A)single solvent and (B)mixed solvent

**Table1:** Prediction results for mixed solvent exhibiting synergistic effect.

binary Solvent		measured values	calculation values <sup>*1</sup>	prediction values <sup>*2</sup>
solvent1	solvent2			
A	B	15.5	11.9	14.8
	C	5.3	2.4	6.7
	F	11.4	3.7	10.9
C	A	6.0	3.8	7.8
	D	2.3	1.3	2.6
D	C	2.6	1.2	3.0
	F	5.3	2.7	4.7
E	B	15.8	15.1	15.9
F	A	9	4.3	9.2
	D	3.4	1.9	3.3

\*1: calculation value = solvent1  $\times$  a + solvent2  $\times$  (1-a)    a = blend ratio

\*2: Predicted by solubility prediction model using mixed solvent.

## 【まとめ】

機械学習法によって作成された溶解性予測モデルは、高い予測性能を保持することが確認された。また、混合溶媒の予測モデルでは、相乗効果のある溶解性評価も可能であることから、溶媒を組み合わせることによる溶解度の増減傾向も学習できていることが示唆された。

本モデルは、新規・代替溶剤探索や溶剤の最適な組み合わせ探索などに適用できると期待する。